

審査の結果の要旨

論文提出者氏名 渡辺宙志

水は冷やすと凍り、温めると沸騰する。あるものは導電し、磁性をもち、あるいは劇的に伸縮する。この世界には実に多様な物質が存在する。個々の物質がそれぞれの性質を示すのはどうしてかを、原子・分子の集合体の性質として解明・究明することが熱統計力学の目標である。19 世紀の中ごろから始まった研究も、今日ではほぼ完成した。多くの疑問・問題が、少なくとも理論的には解決された。熱統計力学のこの偉業が計算機の発展と相補的であることは、今世紀の科学技術を見通す上で注目に値しよう。解析的には得られなかった理論的予測の答えを導く上で、計算機シミュレーションの威力は無視できないものであった。

大きな成功を収めた統計物理学ではあるが、未解決の難問も決して少なくはない。その 1 つが、2 次元剛体粒子系の融解転移である。密度を変化させるとこの系は固体と流体とに相転移することが、1950 年代後半に計算機シミュレーションにより発見された。当初は日常よく経験する融解転移と思われていたこの現象が、実は 2 次元独特の相転移であるコスタリッツ・サウレス転移 2 回を経てのものである可能性が指摘され、爾来 30 余年、その当否は決着が付きずに今日に至っている。

本論文で第 3 章ではこの現象を、主に並列計算機を用いた事象駆動型粒子動力学シミュレーションによる非平衡緩和過程の解析から研究し、確かにコスタリッツ・サウレス転移 2 回を経てのものであることを強く示唆する結果を得た。この成果は 2 次元融解転移に関する業績であるとともに、計算機シミュレーションの新しい手法としても注目に値する。過去 10 余年の研究から、熱平衡状態を非平衡緩和過程から解析する非平衡緩和法は多くの成果を挙げ、計算機シミュレーションの新しい手法として定着している。これまでは専らモンテカルロ時間発展による非平衡緩和過程が解析されてきたが、本研究で初めて正準時間発展の非平衡緩和過程を使った非平衡緩和法が実証されたのである。

本論文ではさらに、粒度分散をもった 2 次元剛体粒子系の性質を非平衡緩和法他で解析し、相図の概形を提唱している (第 4 章)。第 5 章では粒子系に対して、棄却なし法という新しいモンテカルロアルゴリズムを提唱している。

付録 A には熱平衡状態から遠くはなれた現象の例としてミルククラウン現象 (液膜破碎現象) の統計物理学的解析を、付録 B には量子情報処理研究のために開発した CAD およびシミュレータを含む。

本論文は、その研究成果の重要性・広がりのみならず、関係する問題の教科書としても優れたものと評価される。

よって本論文は、博士 (工学) の学位請求論文として合格と認められる。